Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 309, 2004 г.

Х. Д. Икрамов, М. Матин фар

О КОМПЬЮТЕРНО–АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ НА НЕОТРИЦАТЕЛЬНОМ ОРТАНТЕ

§1. Введение

Настоящая статья — пятая среди наших публикаций, посвященных различным аспектам компьютерно-алгебраической реализации метода наименьших квадратов. При этом в работах [1–3] речь шла о безусловной линейной задаче наименьших квадратов (ЗНК)

$$\min_{x\in\mathbf{R}^n} ||Ax-b||_2, \tag{1}$$

где A — заданная $m \times n$-матрица, а b — заданный вектор размерности m. Задача наименьших квадратов с ограничениями в виде линейных уравнений (задача НКУ) рассмотрена в [4].

Наша очередная цель — задача наименьших квадратов с ограничениями в виде линейных неравенств (задача НКН). Она формулируется следующим образом. Пусть заданы (вещественные) $m \times n$-матрица G, $m_2 \times n$-матрица E и векторы h и f размерности соответственно m и m_2. Требуется найти вектор $x \in \mathbf{R}^n$, минимизирующий величину

$$||Ex-f||_2$$

и удовлетворяющий системе линейных неравенств

$$Gx \geq h. \tag{2}$$

Здесь и далее неравенства между вещественными векторами одинаковой размерности понимаются как покомпонентные неравенства.

Известно (см., например, [5]), что задача НКН может быть сведена к своему собственному частному случаю, а именно к так называемой задаче NNLS (Nonnegative Least Squares — наименьшие квадраты с условием неотрицательности): минимизировать

$$||Ex-f||_2 \tag{3}$$

при условии, что

$$x \geq 0. \tag{4}$$

Метод этого сведения, отличающийся от рекомендованного в [5], мы обсудим в следующей статье на данную тему. Однако сама установка на решение задачи НКН посредством вспомогательной задачи (3)–(4) означает, что в пакете программ для задачи НКН алгоритм, решающий задачу NNLS, должен играть центральную роль. Компьютерно-алгебраическая реализация этого алгоритма (алгоритма NNLS) и является предметом настоящей статьи.

В §2 мы напоминаем структуру алгоритма NNLS и обсуждаем возможности повышения его эффективности. Они связаны с тем обстоятельством, что матрицы безусловных ЗНК, решаемых на соседних шагах алгоритма, являются малоранговыми (и даже, как правило, одноранговыми) коррекциями друг друга.

В §3 мы обсуждаем построение тестовых примеров и результаты численных экспериментов с предлагаемой нами реализацией алгоритма NNLS в виде процедуры языка Maple.

§2. Алгоритм NNLS

Алгоритм NNLS (см. [5]) по существу является алгоритмом поиска вектора x, который вместе с двойственным вектором w удовлетворял бы условиям Куна–Таккера для задачи NNLS. Входными данными алгоритма являются целые числа m_2 и n, $m_2 \times n$-матрица E и m_2-вектор f. Алгоритм использует рабочие векторы w и z размерности n и два подмножества P и L индексного множества $\{1, 2, \ldots, n\}$. Компоненты текущего вектора x, индексированные множеством L, имеют значение нуль. Компоненты, индексированные множеством P, могут принимать ненулевые значения. Если значение такой компоненты неположительно, то алгоритм либо изменит его на положительное, либо, установив нулевое значение, переместит индекс компоненты из P в L.

По окончании работы алгоритма в массиве x находится решение задачи NNLS, а в массиве w — двойственный вектор.

Алгоритм NNLS

1. Положить $P = \emptyset$, $L = \{1, 2, \ldots, n\}$, $x = 0$.
2. Вычислить n-вектор $w = E^T(f - Ex)$.
3. Если множество L пусто или $w_j \leq 0$ для всех $j \in L$, перейти к шагу 12.

4. Найти индекс $t \in L$ такой, что $w_t = \max\{w_j \mid j \in L\}$.

5. Переместить индекс t из множества L в множество P.

6. Пусть E_P — матрица размера $m_2 \times n$, определяемая следующим образом:

$$\text{столбец } j \text{ матрицы } E_P = \begin{cases} \text{столбец } j \text{ матрицы } E, & \text{если } j \in P, \\ 0, & \text{если } j \in L. \end{cases}$$

Вычислить n-вектор z как нормальное псевдорешение системы линейных уравнений

$$E_P z = f. \tag{5}$$

Заметим, что компоненты вектора z с индексами $j \in L$ равны нулю.

7. Если $z_j > 0$ для всех $j \in P$, положить $x = z$ и перейти к шагу 2.

8. Найти индекс $q \in P$ такой, что

$$\frac{x_q}{x_q - z_q} = \min\left\{\frac{x_j}{x_j - z_j} \mid z_j \leq 0,\ j \in P\right\}.$$

9. Положить

$$\alpha = \frac{x_q}{x_q - z_q}.$$

10. Переопределить значение x на $x + \alpha(z - x)$.

11. Переместить из множества P в множество L все индексы $j \in P$, для которых $x_j = 0$. Перейти к шагу 6.

12. Закончить вычисления.

Можно считать, что алгоритм NNLS состоит из основного цикла (цикла A) и внутреннего цикла (цикла B). Цикл B составляют шаги 6–11; единственный вход в него — через шаг 6, а единственный выход — через шаг 7.

Цикл A состоит из шагов 2–5 и цикла B. Он начинается шагом 2; выход из цикла — через шаг 3.

В [5, гл. 23, §3] доказано, что алгоритм NNLS конечен, поскольку конечное число раз выполняется цикл A, а внутри него также конечно число повторений цикла B. На практике выход из цикла B обычно происходит при первом же достижении шага 7. Что касается цикла A, то число его повторений, по имеющимся наблюдениям, равно в среднем $\approx \frac{n}{2}$.

Заметим, что задача наименьших квадратов, решаемая на шаге 6, отличается от задачи, решавшейся при предыдущем выполнении этого шага, либо тем, что в матрицу E_P был введен дополнительный ненулевой столбец, либо тем, что из E_P на шаге 11 были удалены один или несколько ненулевых столбцов. И в том, и в другом случае матрицы E_P двух соседних шагов являются малоранговыми (в типичном случае, одноранговыми) коррекциями друг друга. Эта ситуация и вычислительные преимущества, которые из нее можно извлечь, подробно рассмотрены в наших работах [2, 3].

§3. Результаты численных экспериментов

Алгоритм NNLS, описанный в предыдущем разделе, реализован нами в виде процедуры языка Maple. Эта процедура имеет две версии. В версии NNLS1 безусловная ЗНК на шаге 6 решается посредством процедуры Least Squares из стандартной библиотеки системы Maple. В версии NNLS2 для пересчета нормального псевдорешения между каждыми двумя последовательными выполнениями шага 6 используются составленные нами Maple-процедуры AC и DC (от Add Column и Delete Column; см. [3]).

Эффективность указанных двух версий сопоставлялась в двух сериях численных экспериментов. Тестовые задачи для этих экспериментов были составлены с помощью M-матриц.

Напомним, что вещественная $n \times n$-матрица A с неположительными внедиагональными элементами называется M-матрицей, если A невырожденна и обратная матрица A^{-1} (поэлементно) неотрицательна. Хорошо известным примером M-матриц являются матрицы Стильтьеса, т.е. положительно определенные матрицы с неположительными внедиагональными элементами. Положительная определенность симметричной матрицы A с положительной диагональю обеспечивается, например, свойством диагонального преобладания. Так, в наших экспериментах использовалась (для различных значений n) матрица

$$A_n = \begin{pmatrix} n & -1 & -1 & \cdots & -1 \\ -1 & n & -1 & \cdots & -1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -1 & -1 & -1 & \cdots & n \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Пусть матрица системы линейных уравнений

$$Ax = b \tag{7}$$

является M-матрицей, а b — вектор с неотрицательными компонентами. Тогда единственное решение

$$x_0 = A^{-1}b$$

системы (7) также имеет неотрицательные компоненты. Поэтому, полагая в задаче (3)–(4) $E = A$, $f = b$, мы должны получить в качестве решения вектор x_0. Например, задавая в случае матрицы (6)

$$b = (1, 1, \dots, 1)^T, \tag{8}$$

находим

$$x_0 = A_n^{-1}b = (1, 1, \dots, 1)^T = b. \tag{9}$$

В первой серии экспериментов для значений $n = 10, 20, 30, 40, 50$ решалась система (7) с матрицей A_n и правой частью (8). Расчеты велись на персональном компьютере Pentium III с тактовой частотой 650 MHz. Использовалась система Maple-7. Время решения задач данной серии (в секундах) обеими версиями процедуры NNLS показано в табл. 1.

Таблица 1

n	$NNLS1$	$NNLS2$
10	1.6	0.8
20	11.1	5.2
30	44.2	19.5
40	126.6	52.7
50	296.2	120.3

Соотношение (9) означает, что вектор (8) является собственным вектором матрицы A_n^{-1}, отвечающим ее (старшему) собственному значению 1. Нетрудно показать, что A_n^{-1} не имеет других (неколлинеарных) собственных векторов с неотрицательными компонентами. Точно так же, b есть единственный (с точностью до коллинеарности) собственный вектор с неотрицательными компонентами для матрицы A_n. (Он отвечает наименьшему собственному значению 1.) Поэтому задача NNLS с

$$E = \begin{pmatrix} A_n - I_n \\ 1 \cdots 1 \end{pmatrix}, \qquad f = \begin{pmatrix} 0 \\ \cdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{10}$$

где f — вектор размерности $n+1$ с единственной ненулевой компонентой, имеет решение

$$x_0 = \left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)^T. \tag{11}$$

Последнее уравнение задачи

$$x_1 + x_2 + \ldots + x_n = 1$$

имеет смысл нормировочного условия для собственного вектора.

Во второй серии экспериментов матрица и вектор задачи (3), (4) задавались формулами (10) при $n = 10, 20, 30, 40, 50$. Время решения для обеих версий процедуры NNLS показано в табл. 2.

Таблица 2

n	$NNLS1$	$NNLS2$
10	1.3	0.8
20	9.7	5.4
30	38.8	20.0
40	111.6	54.4
50	264.5	123.3

В наши программы был включен счетчик числа повторений шага 6. Для всех наших задач значение этого счетчика на выходе из программы было равно размерности n вектора переменных x. Это связано с тем обстоятельством, что решением является вектор, все компоненты которого строго положительны (вектор (9) или (11)), между тем как начальное приближение всегда есть нулевой вектор (см. шаг 1).

По причинам, разъясненным в разделе 2, мы рассчитывали на бо́льшую эффективность версии NNLS2 по сравнению с NNLS1.

Таблицы 1 и 2 свидетельствуют, что в определенной степени эти ожидания оправдались: NNLS2 работает в 2–2,5 раза быстрее, чем NNLS1. Тот факт, что преимущество NNLS2 не оказалось более убедительным, можно объяснить недостаточной чистотой эксперимента: ведь сравнивались, с одной стороны, библиотечная процедура системы Maple, составленная с использованием всех возможностей этой системы, и, с другой стороны, "сырые" экспериментальные процедуры AC и DC.

Литература

1. Х. Д. Икрамов, М. Матин фар, *О компьютерно-алгебраических процедурах для псевдообращения матриц.* — ЖВМ и МФ, **43** (2003), 163–168.
2. Х. Д. Икрамов, М. Матин фар, *Одноранговые модификации и пересчет псевдообратных матриц.* — Вестник Моск. ун-та. Серия 15. Вычисл. матем. кибернет., No. 4 (2002), 12–17.
3. Х. Д. Икрамов, М. Матин фар, *Пересчет нормальных псевдорешений при одноранговых модификациях матрицы.* — ЖВМ и МФ, **43** (2003), 493–505.
4. Х. Д. Икрамов, М. Матин фар, *О компьютерно-алгебраических процедурах для линейной задачи наименьших квадратов с линейными связями.* — ЖВМ и МФ, **44** (2004), 206–212.
5. C. L. Lawson, R. J. Hanson, *Solving Least Squares Problems.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1974).

Ikramov Kh. D., Matin far M. On the computer-algebra implementation of the least-squares method on the nonnegative orthant.

Maple procedures for solving the so-called NNLS (Nonnegative Least Squares) problem are described. The NNLS problem is to minimize

$$||Ex - f||_2$$

subject to

$$x \geq 0.$$

The solution of an NNLS problem is the crucial step OF the conventional algorithm for solving linear least-squares problemS with linear inequality constraints.

Московский
государственный университет

Поступило 2 февраля 2004 г.